Abgabe: bis zum *10.Nov.2009, 10:00 Uhr* im Postfach von Prof. Rieger

1 Von Pfadintegralen zur Schrödingergleichung

Gegeben sei ein quantenmechanisches Teilchen der Masse m in einer Dimension, welches einem Potential $V(x)$ ausgesetzt wird. Der zugehörige Hamiltonoperator lautet dann: $H = p^2/(2m) + V(x)$. Die Wellenfunktion $\psi(x_2, t_2)$ zur Zeit t_2 lässt sich als Funktion von $\psi(x_1, t_1)$ folgendermaßen schreiben:

$$\psi(x_1, t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 K(x_2, t_2, x_1, t_1)\psi(x_1, t_1). \tag{4.1}$$

1) Zeigen Sie, dass ausgehend von (4.1) für $\psi(x, t+\epsilon)$ als Funktion von $\psi(y, t)$ mit $\epsilon \ll t$ (bis zur niedrigsten Ordnung von ϵ) gilt:

$$\psi(x, t+\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{m(x-y)^2}{2\epsilon}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon V\left(\frac{x+y}{2}\right)\right)\psi(y,t)\frac{dy}{A}. \tag{4.2}$$

Bestimmen Sie auch die Konstante A.

Hinweis : Nutzen Sie die diskretisierte Definition von $Dx(t)$ im Pfadintegral $K(x_2, t_2, x_1, t_1)$ in Gl. (4.1).

2) Zeigen Sie, dass die rechte Seite von (4.2) für kleine ϵ zu folgendem Term entwickelt werden kann:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{A} e^{im\eta^2/(2\hbar\epsilon)}(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}V(x,t)) \times \left(\psi(x,t) + \eta\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} + \frac{1}{2}\eta^2\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \tag{4.3}$$

3) Nutzen Sie Gl.(4.3) und entwickeln Sie beide Seiten von (4.2) in ϵ um die Schrödingergleichung herzuleiten:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t). \tag{4.4}$$

2 Thermodynamik und semiklassische Entwicklung

Gegeben sei ein eindimensionales System, beschrieben durch den Hamiltonoperator $H = p^2/(2m) + V(x)$.

1) Berechnen Sie die Zustandssumme Z^{class} des Systems, in der *klassischen Approximation* und drücken Sie es als Funktion des Integrals $I = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\beta V(x))$ aus.

2) Zeigen Sie mit Hilfe der vorherigen Übungsblätter, dass sich die Zustandssumme wie folgt als Pfadintegral in imaginärer Zeit schreiben lässt:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \rho(y,y) \tag{4.5}$$

$$\rho(x_1, x_2) = \int_{x(0)=x_1}^{x(\beta\hbar)=x_2} Dx(\tau) \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2(\tau) + V(x(\tau))\right)d\tau\right),$$

wobei $\rho(x,y)$ die Dichtematrix bezeichnet.

3) Erklären Sie für den Fall sehr kleiner $\beta\hbar$ warum $V(x(\tau))$ durch $V(y)$ in allen Pfaden, die zu $\rho(y,y)$ beitragen, ersetzt werden kann.

4) Nutzen Sie für den Fall $\beta\hbar \gg 1$ das Ergebnis des Pfadintegrals eines freien Teilchens um folgendes Resultat der klasischen Approximation zu bestätigen:

$$\rho^{\mathrm{class}}(y,y) = \sqrt{\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}} e^{-\beta V(y)}. \tag{4.6}$$

5) Nun sollen die quantenmechanischen Effekte berücksichtigt werden. Daher entwickeln wir die Trajektorien aus Gl. (4.5) um den Erwartungswert, der durch

$$\bar{x} = \frac{1}{\beta\hbar} \int_0^{\beta\hbar} x(\tau) d\tau \tag{4.7}$$

gegeben ist. Führen Sie eine Taylorentwicklung bis zur zweiten Ordnung von $V(x(\tau))$ um $\bar{x}$ durch und beachten Sie den Wechsel der Variablen, um zu zeigen:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \hat{\rho}_{\bar{x}}(y,y) \tag{4.8}$$

$$\hat{\rho}_{\bar{x}}(y,y) = e^{-\beta V(\bar{x})} \int_{y-\bar{x}}^{y-\bar{x}} Du(\tau) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{u}^2(\tau) + \frac{1}{2} u^2 V''(\bar{x}) \right) d\tau \right), \tag{4.9}$$

mit der Bedingung

$$\int_0^{\beta\hbar} u(\tau) d\tau = 0. \tag{4.10}$$

6) Nutzen Sie die Integraldarstellung der δ Funktion um das Erfüllen der Bedingung (4.10) in (4.9) zu garantieren:

$$\hat{\rho}_{\bar{x}}(y,y) \propto \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{y-\bar{x}}^{y-\bar{x}} Du(\tau) \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{u}^2(\tau) + \frac{1}{2} u^2(\tau) V''(\bar{x}) - i\hbar k u(\tau) \right) d\tau \right) \tag{4.11}$$

Hinweis : $\delta(x) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}$.

7) Nutzen Sie das Ergebnis des Pfadintegrals des getriebenen harmonischen Oszillators um in niedrigster nicht verschwindender Ordnung die Korrekturen der semiklassischen Entwicklung zu berechnen:

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \rho^{\mathrm{class}}(\bar{x},\bar{x})(1 - \frac{\beta^2\hbar^2}{24m} V''(\bar{x}) + \mathcal{O}(\hbar^3)) \tag{4.12}$$